

はじめに

「機能元素のナノ材料科学」の意義と今後の展開

幾原 雄一*,**,***

* 東京大学大学院工学系研究科総合研究機構マテリアル工学専攻; 教授

** 財団法人ファインセラミックスセンターナノ構造研究所; 主管研究員

*** 東北大学原子分子材料科学高等研究機構(WPI機構); 教授

Preface to Special Issue on “Nano-Materials Science for Atomic Scale Modification”; Yuichi Ikuhara (*Institute of Engineering Innovation, The University of Tokyo. **Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramic Center, Nagoya. ***WPI Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai.)

Keywords: nanotechnology, lattice imperfections, function providing elements, atomic scale characterization, first principles calculations

2009年5月8日受理

我国の材料技術は日本の産業の発展とともにあり、その基盤を支えて来たといっても過言ではない。しかし、その技術がナノテクノロジーに代表されるように微細化、精密化されるに従い、これまでの経験的要素やノウハウを主体とする手法では将来の見通しが立たない状況になっている。これをブレイクスルーし、今後の材料技術をさらに発展させるためには、マテリアルズサイエンスに立脚した合理的な材料開発が必ず必要になるものと思われる。すなわち、物質・材料の根元である原子・電子構造を計測し、その機能を理論的に予測することで、新たな設計指針を構築していくことが今後の材料分野における大きな課題となるであろう。

今世紀に入ってナノ計測技術は大きく進展し、たとえば球面収差補正技術を駆使した走査透過電子顕微鏡法、ナノプローブ電子分光法、非接触型原子間力顕微鏡、表面X線分光などにおいて顕著な技術革新があった。また、理論計算においても、特に、第一原理熱力学計算手法やマルチスケール計算技術を用いることで、材料の機能特性までを予見できる域に達しつつある。これらの手法の発展により、これまでブラックボックスであった材料の局所的な構造や状態を、高分解能でかつ定量的に解析することが現実的な視野に入ってきた。

このような背景の下、平成19年(2007年)度から、文部科学省より特定領域研究「機能元素のナノ材料科学」が発足した。本領域研究は、上記のように大きく進展しつつあるナノ計測手法と理論計算手法をタイムリーに取り入れ、これらを材料の原子・電子構造、状態、機能の問題に適用し、得られた結果を材料プロセス技術にフィードバックすることにより、新たな材料設計指針を構築することを目的として推進している。材料のマクロな機能特性は、ドーパントとして添加

した元素が界面、表面や転位などの局所領域に偏析することによって決まることが多く、このような元素を本領域では“機能元素”と定義している。したがって、機能元素の状態—機能特性—プロセスの相関性が明らかになれば、“機能元素のナノ材料科学”と呼ぶべき新たな学問体系が構築され、材料科学の発展に大きく貢献することが期待できる。

この特集号は、本特定領域研究でこれまでに得られている成果の一端を紹介したものである。関係分野の研究者に少しでもお役に立てれば幸いである。本特定領域の研究活動で得られた成果は、積極的に外部に情報発信していき、今後の材料分野の活性化につなげていきたいと願っている。2009年5月には、日本金属学会のMaterials Transactions, Vol. 50, No. 5 (2009)における特集として32編の原著論文が既に発表されている。また、2008年6-7月には、本特定領域が主催して、The 1st Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculation (AMTC1)およびInternational Workshop on Theoretical Calculations of ELNES and XANES (TEX2008)の二つの国際会議を名古屋において開催し、それぞれAMTC Letters(vol. 1(2008))およびJ. Phys.: Cond. Matter. (vol. 21, No. 10(2009))の特集号として成果が公開されている。さらに、来年2010年6-7月には、AMTC2を名古屋で、The 13th International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials (日本金属学会JIMC-7, iib2010)を三重県の伊勢市で連続して開催し、本領域研究の成果を公表して予定である。本分野に興味のある研究者の積極的な参加を期待している。なお、本特定領域研究の活動状況は、ホームページ<http://nanodopant.com/>にて公開しているので参照して頂ければ幸いである。



機能元素のナノ材料科学

ATOMIC SCALE MODIFICATION